Control ソフトの使用方法

【目次】

【はじめに】

本文は、Control **ソフトの基本的な使用方法をまとめたものです。簡略して記述しているため、詳しくは別途配布している取扱説明書をご覧ください。また、結晶をマウントした後で本作業を行ってください。**

【注意】

本ソフトを使用している際、メイン画面において右上のダイアログが Rigaku R-AXIS **以外である場合 (例** Measurement in progress : Click stop icon to terminate! **)、ソフトは思考中ですので他の操作は行わないでください。**

【測定手順】

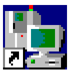
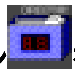
1. **ディスクトップ上にある** Control **アイコン****をダブルクリックしてソフトを立ち上げます。図** 1 **に示すメイン画面が現れます。**



図1．メイン画面

2. **右から** 2 **つ目のディレクトリアイコン****をクリックし、作業フォルダを指定します。図** 2 **のようなウィンドウが現れます。任意のフォルダを指定した後、**[>>]**をクリックし、**Data Directory **に登録します。登録したのを確認後、**[OK]**をクリックします。**

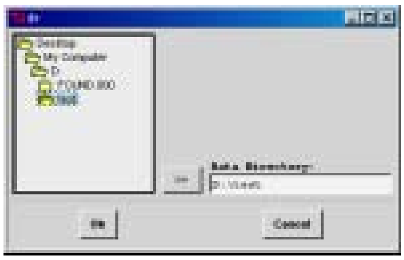


図 2**．作業フォルダ指定画面**

3. **測定はアイコンバーのみで行うことができます。まず、左から** 3 **つ目の** Initialize **アイコン****をクリックし、初期化を行います。確認画面が出ますので**[OK]**をクリックします。**

4. **左から** 4 **つ目の測定アイコン****をクリックします。測定用のウィンドウ 図** 3 **が開きます。**"IP Read" "X-ray" "Crystal" "Phi axis" "Measurement list"**の順に必要事項を入力していきます。入力項目については、次頁に詳しく説明します。**default **値以外に入力が必要なものは太字にしています (図には□で表示)。また、入力は英語半角で行います。**

5. IP Read (図 3)

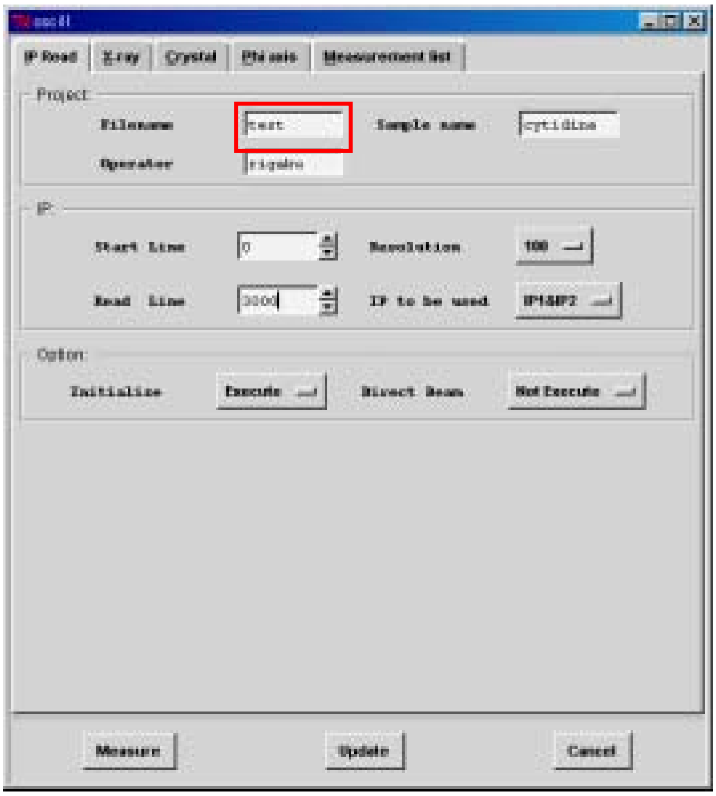


図 3. 測定ウィンドウーIP read タグ

・Project

File name : ここに入力した名前が測定後のファイル名の一部に使用されます

(上記の場合) test001.img

Sample name : 任意のテキストを入力

Operator : 測定者名

・IP

Start Line : 読み取りのスタート位置 (必ず 0 であることを確認してください)

Read Line : 読み取りライン数 (必ず 3000 であることを確認してください)

Resolution : IP の分解能 (通常 100 です、50 にはしないでください)

IP to be used : 使用する IP の選択 (IP1&IP2 であることを確認してください)

・Option

Initialize : 測定開始する直前に初期化するかどうかを選択 (Execute で初期化を実行します、通常 Execute)

Direct Beam : 測定フレーム毎にダイレクトビームを打ち込むかどうかを選択 (Not Execute でダイレクトビームは打ち込みません、必ず Not Execute であることを確認してください)

6.　X-ray （図 4）

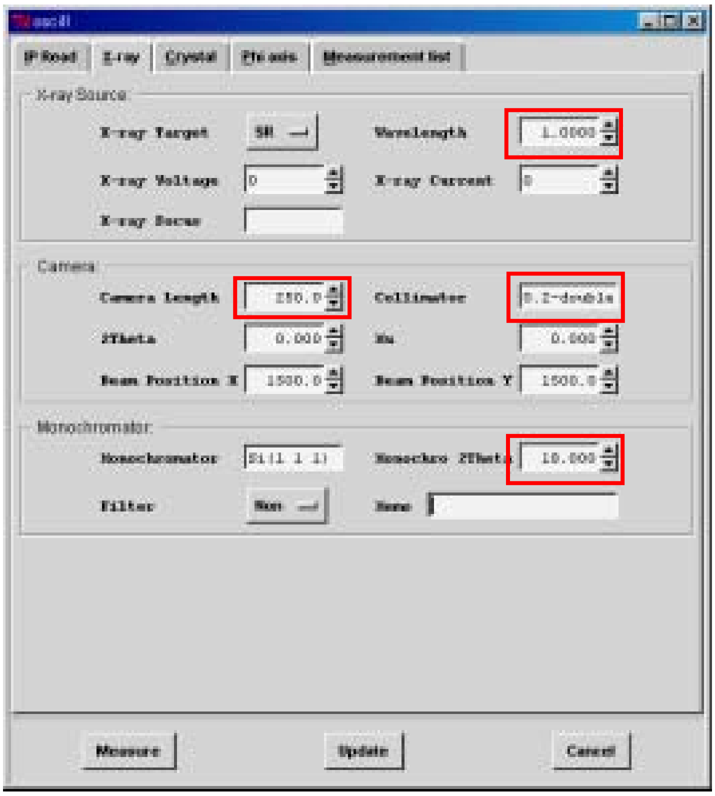


図 4．測定ウィンドウーX-ray タグ

・X-Ray Source

X-ray Target : X **線源の種類を入力** (SR **になっていることを確認してください**)

Wavelength：使用する波長を入力

X-ray Voltage, X-ray, X-ray focus : X **線源にかける出力とフィラメントサイズを入力** (**使用しません**)

・Camera

Camera Length：カメラ長を入力 (**通常** 250mm)

Collimator：使用するコリメータの径を入力

2theta：**ディテクタの振り角** (2**θ**) **を入力** (**通常** 0)

Mu：**ミュー角度を入力** (**使用しません**)

Beam Position X, Beam Position Y：**ダイレクトビーム位置の入力** (**表示された値から変更しない**)

・Monocromator

Monocromator：**使用するモノクロメータを入力** (**通常**　Si(1 1 1))

Monocro 2Theta：モノクロメータへの入射角を入力 (**波長を変更した場合のみ変更**)

Filter：**使用するフィルタを入力** (**通常** Non)

Memo：**任意のテキストを入力**

7.　Crystal（図 5）

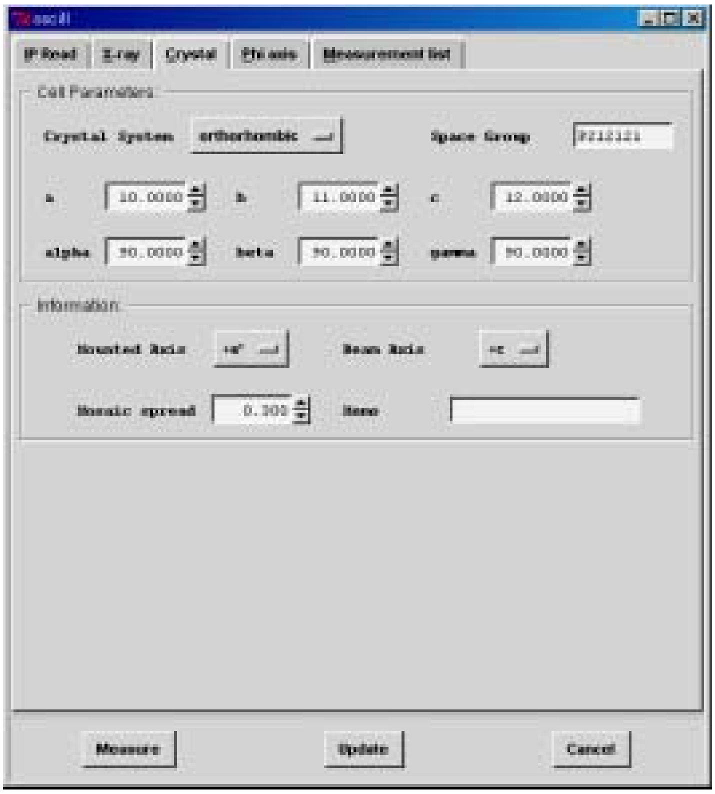


図 5. 測定ウィンドウーCrystal タグ

・Crystal

Crystal System： 結晶系を入力（通常入力する必要はありません）

Space Group： 空間群を入力（通常入力する必要はありません）

Cell　Parameters a，b，c，α，β，γ： 格子定数を入力（通常入力する必要はありません）

・Information

Mount Axis： φ(phi)軸に平行な逆格子軸を選択（通常入力する必要はありません）

Beam Axis：X 線に平行な実格子軸を選択（通常入力する必要はありません）

Mosaic Spread： 結晶のモザイク幅／deg を入力（通常入力する必要はありません）

Memo： 任意のテキストを入力（通常入力する必要はありません）

8.　Phi axis （図 6）

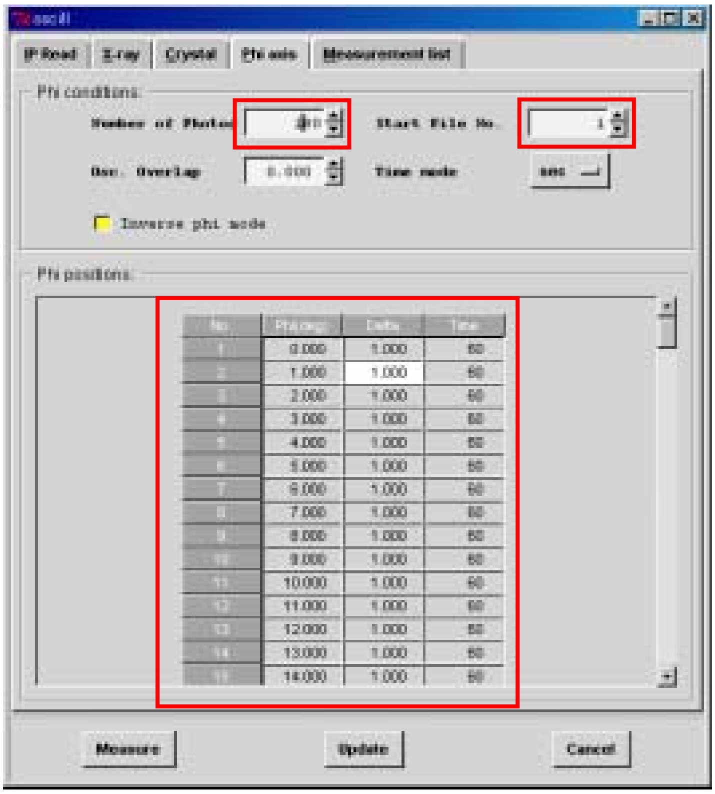


図 6. 測定ウィンドウーPhi axis タグ

・Phi conditions

Number of Photos：測定を行う数を入力（最大連続測定枚数は 200 枚）

Start File No.：測定開始フレーム No.を入力（初めから測定する場合は 1 を、途中から測定する場合はそのフレーム No.を入力）

OSC. Overlap：部分反射(partial)を少なくするため、振動をオーバーラップさせながら測定を行う場合のオーバーラップ角度を入力（通常 0）

Time mode：露光時間の単位を選択（min か sec）

Inverse phi mode：倒立型 phi 軸ゴニオの場合チェック（チェックしない）

・Phi position

No.：フレーム No.

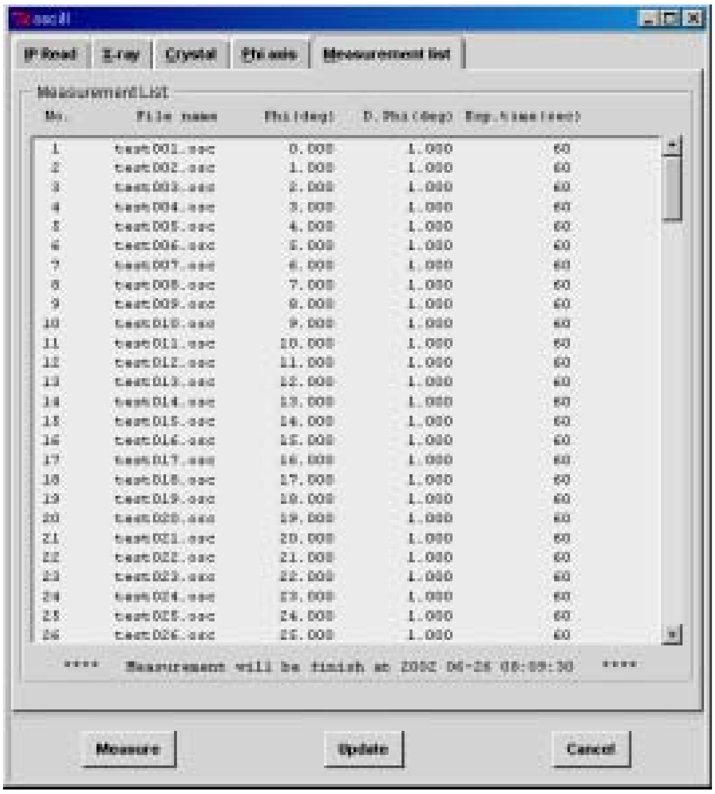
Phi(deg)：Phi 軸の開始角度を入力（途中の Phi 軸位置を入力した場合，それ以降の Phi は再計算）

Delta：Phi 軸の振動角を入力（途中で Delta Phi を変更した場合、それ以降の Phi, Delta Phi は再計算）

Time：露光時間を入力（途中で Time を変更した場合、それ以降の Time は入力した値に変更）

（注）時間の単位は time mode で選択したものとなります

9. Measurement List (**図** 7)



No.	File name	Phi(deg)	D.Phi(deg)	Exp.time(sec)
1	test001.osc	0.000	1.000	60
2	test002.osc	1.000	1.000	60
3	test003.osc	2.000	1.000	60
4	test004.osc	3.000	1.000	60
5	test005.osc	4.000	1.000	60
6	test006.osc	5.000	1.000	60
7	test007.osc	6.000	1.000	60
8	test008.osc	7.000	1.000	60
9	test009.osc	8.000	1.000	60
10	test010.osc	9.000	1.000	60
11	test011.osc	10.000	1.000	60
12	test012.osc	11.000	1.000	60
13	test013.osc	12.000	1.000	60
14	test014.osc	13.000	1.000	60
15	test015.osc	14.000	1.000	60
16	test016.osc	15.000	1.000	60
17	test017.osc	16.000	1.000	60
18	test018.osc	17.000	1.000	60
19	test019.osc	18.000	1.000	60
20	test020.osc	19.000	1.000	60
21	test021.osc	20.000	1.000	60
22	test022.osc	21.000	1.000	60
23	test023.osc	22.000	1.000	60
24	test024.osc	23.000	1.000	60
25	test025.osc	24.000	1.000	60
26	test026.osc	25.000	1.000	60

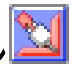
図 7**. 測定ウィンドウー**Measurement List **タグ**

測定のリストが表示されます。No. (**測定開始フレーム** No.)、File name、Phi (deg) (φ **軸開始位置**)、D. Phi (deg) (**振動角**)、Exp. Time (sec) (**露光時間**) **を再確認してください。ウィンドウ下方におおよその測定終了時間が計算されています。**

Update **ボタンを押すと測定条件のデフォルト値を現在のものに更新します。** Cancel **を押すとアップデートせずにダイアログが消え、全ての入力は無効になります。** Measure **を押すと測定が開始されます。**

【その他の機能】

1. **測定を、急遽終了したい場合は、右端にある** Emergency **アイコン****をクリックしてください。確認メッセージが現れますので** OK **をクリックします。測定を終了します。**

2. Control **ソフトを終了する場合は、**Exit **アイコン****をクリックします。確認メッセージが現れますので** OK **をクリックします。**

【付録】

＜異常分散データ測定の設定＞

Zn、Cu、Se、S **で測定を行う場合について、およその波長と分解能を下表にまとめます。参考にして下さい。**
波長およびカメラ長を決定後、本書　測定手順の 6. **にある** Wavelength、Camera Length **を変更してください。**

元素	波長（Å）	カメラ長 (mm)			
		150	200	250	300
Se	0.9794	1.28	1.55	1.83	2.13
Zn	1.2836	1.68	2.03	2.40	2.79
Cu	1.3808	1.80	2.18	2.59	3.01
S	1.7000	**2.01**	**2.44**	**2.89**	**3.36**

＜R-AXIS IV++**で測定したデータを** CrystalClear **で処理する場合の注意点＞**

6 **月** 4 **日現在、** CrystalClear **でのφ軸方向の設定が**（1,0,0）**で** vertical **にセッティングされています。そのため、処理を行う前にメイン画面の** Utilities – Header/Database-Editor **で** ROTATION_VECTOR、**および** SCAN_ROTATION_VECTOR **の値を**(0,-1,0）**に変更してください。**

＜CrystalClear **の処理データを** mtz(CCP4)**への変換方法＞**

CCP4 **にある** dtrek2mtz **を用いて変換します。**CrystalClear **のデータは、**ScalAverage.ref **を使用します。**

＜放射光データを CrystalStructure で処理を行う時の注意点＞

CrystalStructure には異常分散項を入力するファイルがあります。

C:¥Program Files¥CrystalStructure¥dbase の中にある SCATT ファイルを書き換えることで、処理ができるようになります。以下のように書き換えます (text エディタを使用) 。

```
0.5608   0.7107   1.5418  ←——波長です(左から1、2、3)
H        0.       0.       ←——1の異常分散項 (⊿f と⊿f")
H        0.       0.       ←——2の異常分散項 (⊿f と⊿f")
H        0.       0.       ←——3の異常分散項 (⊿f と⊿f")
         ・
         ・
         ・
BR       0.181 1.645      ←——1の異常分散項 (⊿f と⊿f")
BR       -0.374 2.456    ←——2の異常分散項 (⊿f と⊿f")
BR       -0.767 1.283    ←——3の異常分散項 (⊿f と⊿f")

         ↓

1.0000   0.7107   1.5418  ←——波長を変更
H        0.       0.
H        0.       0.
H        0.       0.
         ・
         ・
         ・
BR       -2.203 0.590    ←——1の異常分散項を変更
BR       -0.374 2.456
BR       -0.767 1.283
```

変更後計算できます